*** مقایسه لوانسوی ۲ :

*ذرات یکسان : عملگر تبادل

$S_i \longleftrightarrow S_J$

متقارن ⟵ اسپین صحیح – بوزون $S=0, 1, 2, \ldots$

پادمتقارن ⟵ اسپین نیمه صحیح – فرمیون $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots$

$S_1 = \frac{1}{2}$, $S_2 = \frac{1}{2}$

$$\begin{cases} \chi_{singlet} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right) & \text{پادمتقارن} \\ \chi_{triplet} = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right) \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} & \text{متقارن} \end{cases}$$

$S_1 = 1$, $S_2 = 1$

$$\begin{cases} \chi_1 & \text{متقارن} \\ \chi_3 & \text{پادمتقارن} \\ \chi_5 & \text{متقارن} \end{cases}$$

تابع موج کل $\equiv$ $\underbrace{\text{تابع موج اسپین}}_{\chi}$. $\underbrace{\text{تابع موج فضایی}}_{\psi}$

(اتم ها)

$$\text{فرمیون ها} = \begin{cases} \psi_s \chi_a \equiv \psi_s \chi_{singlet} \\ \psi_a \chi_s \equiv \psi_a \chi_{triplet} \end{cases}$$

لایه n

اوربیتال $L = 0, 1, 2, \ldots$
$\quad s \; p \; d \; f \; g$

$l = \sum_i l_i$ تکانه زاویه‌ای مداری

$S = \sum_i s_i$ تکانه زاویه‌ای

$2S+1$

$S, d, d, \ldots \longleftarrow {}^{2S+1}L_J \longrightarrow J = L + S$ نمایش اسپکتروسکپی

$(1s)^2(2s)^2$

$S = \frac{1}{2}$, $S = -\frac{1}{2}$ ⟵ $L=0$

$S = \frac{1}{2}$, $S = -\frac{1}{2}$ $\longrightarrow S = 0$

$L = 0 \longrightarrow L = 0 \Rightarrow J = 0$

$\underbrace{{}^1S_0}_{\text{بور } B} \equiv Be$

$(1s)^2(2s)^2\ (2p)^1$

$\underbrace{(1s)^2(2s)^2}_{S=0,\ L=0}$ $\quad$ $\underbrace{(2p)^1}_{S=\frac{1}{2},\ L=1}$ $\longrightarrow$ $S=\frac{1}{2}$, $L=1$

$J=\frac{1}{2}\ ,\ \frac{3}{2}$

$^2P_{\frac{1}{2}}$ بور $\qquad$ $^2P_{\frac{3}{2}}$ $\longrightarrow$ دو تا حالت وجود دارد

اوربیتالی پر می‌شود که انرژی کمتری داشته باشد

* قاعده هوند: ۱) ترازی که S از همه بیشتر است زودتر پر می‌شود.

۲) S مساوی ترازی که L از همه بیشتر است زودتر پر می‌شود.

۳) L مساوی { اگر بیشتر از نصف شده $\quad J=L+S$

〃 〃 〃 $\quad J=L-S$

$(1s)^2(2s)^2(2p)^2$ $\qquad$ کربن C

$S=0 \qquad S=\frac{1}{2}\ ,\ S=\frac{1}{2} \longrightarrow S=0,1 \longrightarrow \begin{cases} S=0 & \text{پادمتقارن} \\ S=1 & \text{متقارن} \end{cases}$

$L=0 \qquad L=1\ ,\ L=1 \longrightarrow L=0,1,2 \longrightarrow \begin{cases} L=0 & \text{متقارن} \\ L=1 & \text{پادمتقارن} \\ L=2 & \text{متقارن} \end{cases}$

$S=0$	$S=0$	$S=1$
$L=0$	$L=2$	$L=1$
$\downarrow$	$\downarrow$	$\downarrow$
$J=0$	$J=2$	$J=0,1,2$

$^1S_0 \qquad {}^1D_2 \qquad \boxed{{}^3P_0 \quad {}^3P_1 \quad {}^3P_2}$

$^3P_0$: کمترین انرژی را دارد.

$C \equiv {}^3P_0$

* نیروی تبادلی = مسئله یک بعدی در نظر بگیریم:

برهم متعامد هستند $\quad \psi_b(x) \quad \psi_a(x) \quad$ دو تا ذره یکسان

$x_1 \qquad x_2 \qquad d=\langle (x_1-x_2)^2\rangle = ?$

۱) ذرات تمیزپذیر

$$\psi=\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)$$

۲) ذرات تمیزناپذیر فرمیون

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)-\psi_a(x_2)\psi_b(x_1)\right)$$

۳) ذرات تمیزناپذیر بوزون

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_n(x_1)\psi_b(x_2)+\psi_a(x_2)\psi_b(x_1)\right)$$

$$d=\langle(x_1-x_2)^2\rangle=\langle x_1^2-2x_1x_2+x_2^2\rangle=\langle x_1^2\rangle-2\langle x_1x_2\rangle+\langle x_1^2\rangle=$$

$$\int x_1^2\,|\psi(x_1,x_2)|^2\,dx_1dx_2 \qquad \langle x_2^2\rangle$$

$$\text{(۱) حالت}=\int x_1^2|\psi_a(x_1)|^2\,|\psi_a(x_2)|^2\,dx_1\,dx_2$$

$$=\int x_1^2\,|\psi_a(x_1)|^2dx_1\underbrace{\int|\psi_b(x_2)|^2dx_2}_{1}=\langle x^2\rangle_a$$

$$\langle x_2^2\rangle=\int x_2^2\,|\psi(x_1,x_2)|^2\,dx_1dx_2=\langle x^2\rangle_b$$

$$\langle x_1,x_2\rangle=\int x_1x_2\,|\psi_a(x_1)|^2\,|\psi_b(x_2)|^2=$$

$$\underbrace{\int x_1|\psi_a(x_1)|^2dx_1}_{\langle x\rangle_a}\,\underbrace{\int x_2|\psi_b(x_2)|^2dx_2}_{\langle x\rangle_b}$$

حالت تمیزپذیر

$$\uparrow\; d=\langle x^2\rangle_a+\langle x^2\rangle_b-2\langle x\rangle_n\langle x\rangle_b$$

* برای ذرات تمیزناپذیر کوانتومی:

$$\langle x_1^2\rangle=\int x_1^3\left|\frac{1}{\sqrt{2}}\underline{\left(\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)=\psi_b(x_1)\psi_a(x_2)\right|^2}dx_1dx_2\right.$$

$$\frac{1}{2}\Big(|\psi_a(x_1)|^2|\psi_0(x_2)|^2+|\psi_b(x_1)|^2|\psi_a(x_2)|^2$$

$$\pm\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)\psi_b^*(x_1)\psi_a^*(x_2)\pm\psi_a^*(x_1)\psi_b^*(x_2)$$

$$\psi_b(x_1)\psi_a(x_2)$$

$$= \frac{1}{2}\langle x_1^2\rangle_a + \frac{1}{2}\langle x_1^2\rangle_b \pm \frac{1}{2}\langle x_1^2\rangle_{ab} \int \psi_a(\cancel{x_2})\psi_a^*(x_2)\,dx_2 \pm \frac{1}{2}\langle x_1^2\cancel{\rangle}_{ab}$$

$$\langle x_1 x_2\rangle = \frac{1}{\alpha}\int x_1 x_2 \qquad \int \psi_b^*(x_2)\psi_a(x_2)\,dx_1$$

$$\langle x_2^2\rangle = \int x_2^2 |\psi(x_1,x_2)|^2\,dx_1\,dx_2 = \frac{1}{2}\langle x\rangle_a + \frac{1}{2}\langle x\rangle_b$$

$$\langle x_1 x_2\rangle = \frac{1}{\alpha}\int x_1 x_2 \Big(\frac{1}{2}\big(|\psi_a(x_1)|^2|\psi_b(x_2)|^2 + |\psi_b(x_1)|^2|\psi_a(x_2)|^2$$
$$\pm \psi_a(x_1)\psi_b(x_2)\psi_b^*(x_1)\psi_a^*(x_2) \pm \psi_a^*(x_1)\psi_b^*(x_2)\psi_b(x_1)\psi_a(x_2)\big)$$

$$= \frac{1}{2}\langle x\rangle_a\langle x\rangle_b + \frac{1}{a}\langle x\rangle_b\langle x\rangle_a \pm \frac{1}{2}\underbrace{\int x_1\psi_a(x_1)\psi_b^*(x_1)}_{\langle x\rangle_{ab}}\underbrace{\int x_2\psi_b(x_2)\psi_n^*(x_2)}_{\langle x\rangle_{ab}^*}$$

$$\pm \frac{1}{2}\underbrace{\int x_1\psi_a^*(x_1)\psi_b(x_1)\,dx_1}_{\langle x\rangle_{ab}^*}\underbrace{\int x_2\psi_b^*(x_2)\psi_a(x_2)\,dx_2}_{\langle x\rangle_{ab}}$$

$$= \langle x\rangle_a\langle x\rangle_b \pm |\langle x\rangle_{ab}|^2$$

$$d = \langle x_1^2\rangle + \langle x_1^2\rangle - 2\langle x_1 x_2\rangle$$

نیروی تبادلی

d بوزون / فرمیون $= \langle x^2\rangle_a + \langle x^2\rangle_b - 2\langle x\rangle_a\langle x\rangle_b \mp 2|\langle x\rangle_{ab}|^2$

d تمیزپذیر $= \langle x^2\rangle_a + \langle x^2\rangle_b - 2\langle x\rangle_a\langle x\rangle_b$